

CH₃CHF自由基与HNCO反应机理的理论

刘俊伶; 尚静; 王佩怡; 李来才; 田安民

四川师范大学化学学院成都610066; 四川大学化学学院成都610064

摘要:

采用密度泛函理论的B3LYP方法, 在6-311++G(d, p)基组水平上研究了CH₃CHF自由基与HNCO的微观反应机理, 优化了反应过程中的反应物、中间体、过渡态和产物, 在QCISD(T)/6-311++G(d, p)水平上计算体系在反应通道各驻点的能量. 振动分析结果和IRC分析结果证实了中间体和过渡态的真实性, 计算所得的成键临界点电荷密度变化也确认了该反应过程, 并找到了七条反应通道. 其中生成氟代烷基酰亚胺稳定分子的通道活化能垒最低, 在该反应体系中是与氢迁移平行竞争较易发生的一条反应通道.

关键词: CH₃CHF自由基 HNCO 反应机理 活化能垒

收稿日期 2005-12-05 修回日期 2006-01-19 网络版发布日期 2006-07-07

通讯作者: 李来才 Email: lllcmail@163.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1577KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ [CH₃CHF自由基](#)

▶ [HNCO](#)

▶ [反应机理](#)

▶ [活化能垒](#)

本文作者相关文章

▶ [刘俊伶](#)

▶ [尚静](#)

▶ [王佩怡](#)

▶ [李来才](#)

▶ [田安民](#)